ISNN 3030-3907

2026
MAY
ISSUE - 5
VOLUME - 7

DEVELOPMENT OF SCIENCE

scientific journal



Development of science

Ilmiy jurnal

MAY 2026
Issue - 5, VOLUME – 7

ISSN 3030 -3907

Ilmiy jurnal OAK rayosatining 2024 yil 27 sentabrdagi 361-son qaroriga asosan 02.00.00 kimyo fanlari hamda 2025 yil 12 fevral 367- son qaroriga asosan 05.00.00 texnika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) va fan doktori (DSc) ilmiy darajasiga talabgorlarning dissertatsiya ishlari yuzasidan dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan milliy ilmiy nashrlar ro‘yxatiga kiritilgan.

BOSH MUHARRIR:
Temirov Alisher Hoshim o‘g‘li – texnika fanlari falsafa doktori (PhD),Dotsent.
TAHRIRIYAT KENGASH RAISI:
Fozilov Sadriddin Fayzullayevich – texnika fanlari doktori, professor
TAHRIRIYAT KENGASH A’ZOLARI

TEXNIKA FANLARI/ TECHNICAL SCIENCES/ ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Bozorov G‘ayrat Rashidovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Abdurahmonov Olim Rustamovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Adizov Bobur Zamirovich
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Umumiy va noorganik kimyo instituti, professor
Hayitov Ruslan Rustamjonovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Jumayev Qayum Karimovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Berdiyev Dorob Murodovich
Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti, professor
Maxmudov Rafiq Amonovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Tilloyev Lochin Ismatilloyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Raxmonov Qahramon Sanakulovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Barakayev Nusratullo Rajabovich
Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti, professor.
Jo‘rayev Xayrullo Fayziyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Panoyev Erali Rajabboyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Ataullayev Sherzod Nabiullyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Murodov Malik Negmurodovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Axmedova Ozoda Bahronovna
Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti.
Safarov Bahri Jumayevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Xaydarov Axtam Amonovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Safarov Jasur Alijon o‘g‘li
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.

KIMYO FANLARI/ CHEMICAL SCIENCES/ ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Axmedov Voxid Nizomovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Umarov Baqo Bafoyevich
Buxoro Davlat Universiteti, professor
Kodirov Abduaxad Abduraximovich
Qarshi davlat Universiteti, professor
Qurbonov Mingniqul Jumagulovich
Qarshi davlat Universiteti, dotsent
Turemuratov Sharibay Naurizbaevich
O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Qoraqalpog‘iston bo‘limi Bosh ilmiy kotibi, professor
Tursunov Kaxor Shonazarovich
Qarshi davlat Universiteti, professor
Do‘stov Hamro
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor
Panoyev Nodir Shavkatovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Olimov Bobur Bahodir o‘g‘li
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Kasimov Sherzod Abduazimovich
Termiz Davlat Universiteti, professor.
Aliqulov Rustam Valiyevich
Termiz Davlat Universiteti, professor
Tropov Xamza Tursunovich
Samarqand Davlat Universiteti, professor

IQTISODIYOT FANLARI/ ECONOMICS/ ЭКОНОМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Nizamov Aslitdin Badreddinovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Boboyev Akmal Choriyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Ergashxojayeva Shaxnoza Djasurovna
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, professor
Saidaxmedova Nodira Ilxomovna
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, professor
Muxsinov Bekzod Toxirovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Shakarov Qulmat Ashirovich
Renessans ta'lim universiteti,dotsent.
Jumaeva Zulfiya Qayumovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Norova Salomat Yusupovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Avezova Shaxnoza Maxmudjonovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Jalilov Jamshid G‘anijonovich
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, dotsent
Xasanova Gulruh Djumanazarovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.

PEDAGOGIKA FANLARI/ PEDAGOGICAL SCIENCES / ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ НАУКИ

Siddiqova Sadoqat G‘afforovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Zoyirov Erkin Xalilovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, DSc, professor
Gaffarov Feruz Hasanovich
Puchon Universiteti, *professor*
Ruziyev Davron Yuldashevich
Buxoro Davlat Universiteti, professor
Muradova Firuza Rashidovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Yunusova Gulandon Samiyevna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
To‘xtayeva Zebo Sharifovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Navro‘zova Gulchixra Nigmatovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Uzoqova Laylo Polvonovna
Buxoro muhandislik – texnologiya instituti, dotsent.
To‘raqulova Marjona Qiyom qizi
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Muradova Zarina Rashidovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Murodov Sanjar Aslonovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Shodiyev Jahongir Jo‘raqulovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent
Gaffarov Laziz Hasanovich
Buxoro muhandislik – texnologiya instituti, dotsent.

Tahririyat a’zolarning to‘liq ro‘yxati jurnalning www.devos.uz saytida keltirilgan.

Tahririyat hay’ati a’zolarining tarkibini o‘zgartirish hamda qo‘shimcha kiritish yoki tahririyat a’zoligidan chiqarish bosh muharrir tomonidan amalga oshiriladi.

ISSN 3030-3907

Development of science ilmiy jurnali 2024 yil 15 aprel kuni №256445 sonli guvohnoma bilan Davlat ro‘yxatidan o‘tgan.

To‘plam elektron ko‘rinishda (pdf formatida) mualliflarga taqdim etiladi. To‘plamga kiritiladigan maqolalarning mazmuni, ulardagi statistik ma’lumotlar va me’yoriy hujjatlarning to‘g‘riligiga hamda har qanday fikr - mulohazalarga mualliflarning o‘zlari mas’ul hisoblanadilar. Talablarga javob bermaydigan maqolalar to‘plamga kiritilmaydi. Tashkiliy qo‘mita maqola matnini qisqartirish, qisman tuzatish kiritish, seksiyalarga joylashtirish huquqiga ega.

ISSN 3030-3907

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ МОНОМЕРА ПЕКТИНОВОГО ПОЛИСАХАРИДА С ПОМОЩЬЮ СИСТЕМЫ PASS ONLINE

Сиддикова С.К.
Ташкентский Национальныйуниверситет Узбекистана, кафедра Природных соединений и прикладной химии, PhD.
E-mail:sevinch.siddikova@inbox.ru
Tel: 998909085152
Юлдашева Ф.С.
Ташкентский Национальный университет Узбекистана, Природные соединения и прикладная химия, студенты 4-курса
Гуломкадирова Ш.
Ташкентский Национальный университет Узбекистана, Природные соединения и прикладная химия, студенты 4-курса
Султонова Д.
Ташкентский Национальный университет Узбекистана, Природные соединения и прикладная химия, студенты 4-курса
Шукурова Ш.М.
Ташкентский Национальный университет Узбекистана, Природные соединения и прикладная химия, студенты 4-курса

Аннотация. Проведён теоретический анализ биологической активности и токсичности мономера пектинового полисахарида с использованием системы PASS Online. Установлено, что исследуемое соединение с высокой вероятностью является субстратом цитохрома P450 (Pa=0.805), что указывает на его активное участие в процессах биотрансформации. Выявлены потенциальные антибактериальные свойства, связанные с ингибированием ферментов углеводного обмена. Также обнаружена прогнозируемая противоопухолевая активность (Pa=0.537), вероятно обусловленная взаимодействием с галектином-3. Анализ токсичности показал низкий риск нейротоксических и респираторных эффектов. Полученные результаты подтверждают перспективность мономеров пектина как потенциальных фармакологически активных соединений.

Ключевые слова:пектиновые полисахариды, мономер пектина, PASS Online, биологическая активность, токсичность, цитохром P450.

Abstract. A theoretical analysis of the biological activity and toxicity of a pectin polysaccharide monomer was performed using the PASS Online system. The compound demonstrated a high probability of being a cytochrome P450 substrate (Pa=0.805), indicating active involvement in metabolic processes. Potential antibacterial properties associated with inhibition of carbohydrate metabolism

enzymes were identified. Predicted antineoplastic activity (Pa=0.537) was also detected, possibly related to interaction with galectin-3. Toxicity analysis revealed low risks of neurotoxic and respiratory effects. The obtained results confirm the potential of pectin monomers as promising pharmacologically active compounds.
Keywords: pectic polysaccharides, pectin monomer, PASS Online, biological activity, toxicity, cytochrome P450.
Annotatsiya. PASS Online tizimi yordamida pektin polisaxaridi monomerining biologik faolligi va toksikligi nazariy jihatdan tahlil qilindi. Tadqiqot natijasida moddaning sitoxrom P450 substrati bo‘lish ehtimoli yuqori ekanligi aniqlandi (Pa=0.805), bu uning metabolik jarayonlarda faol ishtirok etishini ko‘rsatadi. Uglevod almashinuvi fermentlarini ingibirlash bilan bog‘liq potensial antibakterial xususiyatlar ham kuzatildi. Shuningdek, galektin-3 bilan bog‘liq bo‘lishi mumkin bo‘lgan o‘smaga qarshi faollik (Pa=0.537) aniqlandi. Toksiklik tahlili neyrotoksik va respirator nojo‘ya ta’sirlar xavfi pastligini ko‘rsatdi. Olingan natijalar pektin monomerlarining istiqbolli farmakologik birikmalar ekanligini tasdiqlaydi.
Kalit so‘zlar: pektin polisaxaridlari, pektin monomeri, PASS Online, biologik faollik, toksiklik, sitoxrom P450.

ВВЕДЕНИЕ.

Пектиновые полисахариды широко распространены в растительном мире и проявляют разнообразные биологические свойства, включая антиоксидантную, иммуномодулирующую и противоопухолевую активность. Однако фармакологический потенциал их структурных единиц — мономеров, особенно в модифицированной (этерифицированной) форме, изучен недостаточно. В последние годы возрастает интерес к использованию методов компьютерного моделирования и виртуального скрининга для предварительной оценки биологической активности соединений. Применение системы PASS Online позволяет эффективно прогнозировать спектр фармакологической активности и токсичности, что существенно ускоряет процесс поиска новых биологически активных веществ. В этой связи исследование мономеров пектина с использованием in silico подходов является актуальным направлением современной медицинской химии и фармакологии.

ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР. Пектиновые полисахариды являются природными биополимерами, широко распространёнными в клеточных стенках растений и обладающими разнообразной биологической активностью. Согласно современным исследованиям, пектины проявляют антиоксидантные, иммуномодулирующие, противовоспалительные и противоопухолевые свойства. Особый интерес представляет изучение их

ISSN 3030-3907

структурных компонентов — мономерных звеньев, поскольку именно они могут определять фармакологические эффекты соединений. В последние годы активно развиваются методы компьютерного прогнозирования биологической активности, позволяющие проводить первичный виртуальный скрининг веществ. Одной из наиболее используемых систем является PASS Online, основанная на анализе взаимосвязи химической структуры и предполагаемой активности вещества. Применение in silico методов существенно сокращает время и затраты на поиск перспективных фармакологически активных соединений. Исследования показывают, что соединения, содержащие карбоксильные и эфирные группы, способны взаимодействовать с ферментами системы цитохрома P450 и белками, участвующими в канцерогенезе. Однако фармакологический потенциал мономеров пектина остаётся недостаточно изученным, что определяет актуальность дальнейших исследований в данном направлении.

Цель исследования: Провести теоретический анализ спектра биологической активности и токсичности мономерного звена пектинового полисахарида с использованием системы PASS Online и выявить перспективные направления его фармакологического применения.

МЕТОДОЛОГИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ.

Исследование проводилось с использованием методов компьютерного прогнозирования биологической активности и токсичности (in silico analysis) на основе структурной формулы мономера пектинового полисахарида. В качестве объекта исследования был выбран мономер пектина, содержащий пиранозное кольцо, карбоксильные группы и метоксилированный сложноэфирный фрагмент (-$COOCH_3$), характерный для этерифицированных пектинов.

На первом этапе была построена и подготовлена структурная формула исследуемого соединения для последующего виртуального анализа. Прогнозирование спектра биологической активности осуществлялось с использованием системы PASS Online (Prediction of Activity Spectra for Substances), основанной на анализе взаимосвязи химической структуры вещества и вероятных фармакологических эффектов.

В ходе исследования в программу PASS Online вводилась структурная формула мономера, после чего автоматически рассчитывались вероятности наличия различных видов биологической активности. Оценка результатов проводилась по показателям:

- Pa (Probability “to be active”) — вероятность наличия активности;
- Pi (Probability “to be inactive”) — вероятность отсутствия активности.

ISSN 3030-3907

При интерпретации результатов учитывались общепринятые критерии системы PASS:

- Pa > 0.7 — высокая вероятность подтверждения активности в эксперименте;
- Pa = 0.5–0.7 — умеренная вероятность активности;
- Pa < 0.5 — низкая вероятность проявления активности.

Особое внимание уделялось видам активности, связанным с:

- противоопухолевым действием;
- взаимодействием с ферментами системы цитохрома P450;
- антибактериальными свойствами;
- влиянием на ферменты углеводного обмена.

Дополнительно был проведён анализ потенциальной токсичности исследуемого соединения. Оценивались вероятности развития нейротоксических, респираторных и ульцерогенных эффектов. Интерпретация токсикологических параметров также основывалась на значениях Pa.

Полученные данные подвергались сравнительному анализу с литературными сведениями о биологической активности пектиновых соединений и их производных. На основании совокупности результатов оценивалась перспективность исследуемого мономера в качестве потенциального фармакологически активного вещества для дальнейших экспериментальных исследований.

Объектом исследования являлся мономер, выделенный из структуры пектинового полисахарида, структурная формула которого включает пиранозные циклы, карбоксильные группы и сложноэфирный фрагмент (-$COOCH_3$). Прогнозирование биологической активности осуществлялось с помощью веб-сервера PASSOnline. Оценка производилась по параметру Pa (Probability "tobeactive"), где значения Pa> 0.5 указывают на вероятность обнаружения активности в эксперименте.

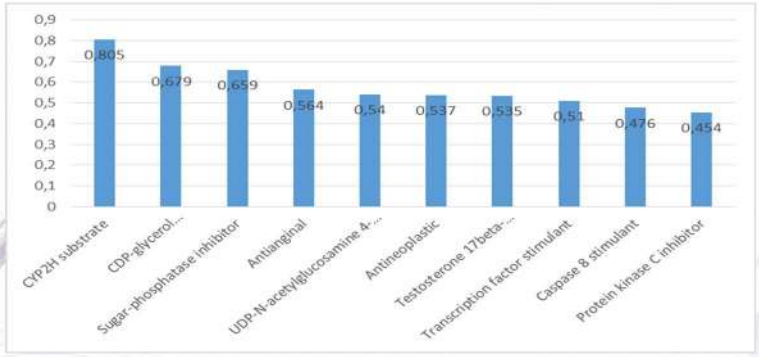


Рис.1. Результаты анализа активности мономера пектина

1. Анализ фармакологического потенциала

ISSN 3030-3907

В результате обработки мономера пектина в системе PASSonline был получен спектр потенциальных активностей. Наибольшие значения Pa зафиксированы для следующих категорий:

- **CYP2Hsubstrate (Pa = 0.805).** Наиболее высокий показатель. Высокая вероятность того, что мономер является субстратом для ферментов семейства цитохрома P450 (CYP2H). Это указывает на активное вовлечение соединения в метаболические процессы в печени. Наличие метильной группы (-CH_3) в структуре ($COOCH_3$) повышает липофильность молекулы, что способствует такому типу взаимодействия с мембраносвязанными ферментами.
- **CDP-glycerol (Pa = 0.679) и Sugar-phosphate inhibitor (Pa = 0.659).** Эти показатели свидетельствуют о способности мономера взаимодействовать с ферментами углеводного обмена и влиять на биосинтез клеточных стенок бактерий, что придает соединению потенциальные антибактериальные свойства.
- **Antineoplastic (противоопухолевая активность) (Pa = 0.537).** Обнаружение данного вида активности представляет особый интерес. Пектиновые фрагменты (содержащие группу -$COOCH_3$), согласно современным данным, способны связывать белок галектин-3, который экспрессируется на поверхности раковых клеток и способствует метастазированию. Выявленный показатель Pa=0,537 является весомым аргументом для дальнейшего изучения данного мономера как потенциального противоопухолевого агента.

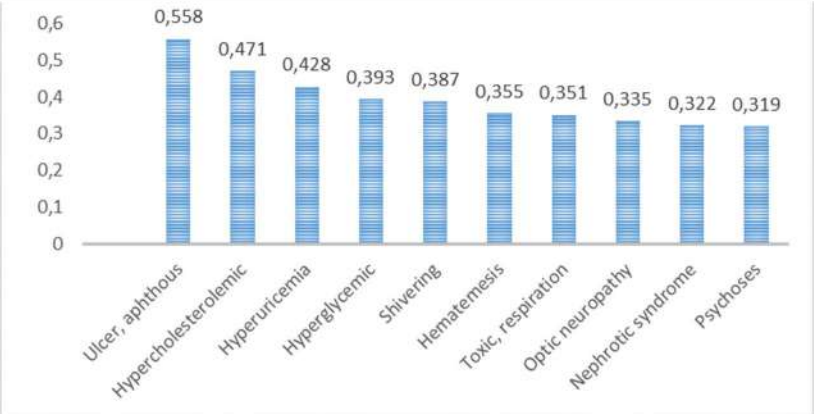


Рис.2. Результаты анализа токсичности мономера пектина

- **2. Анализ токсичности**. Анализ предсказанных токсических эффектов показал, что исследуемое соединение имеет низкуютоксичность:
- Показатели нейротоксичности (Opticneuropathy, Psychoses) находятся в диапазоне **0.319–0.335**, что значительно ниже порогового значения (Pa< 0.4) и позволяет считать соединение безопасным для нервной системы.

ISSN 3030-3907

• Отсутсвует респираторная токсичность (Toxic, respirationPa = 0.351).

• Относительно более высокий показатель для категории "Ulcer, aphtous" (афтозные язвы, стоматит, Pa = 0.558) может быть связан с локальным раздражающим действием эфирных групп ($COOCH_3$) при прямом контакте со слизистыми оболочками, что требует учета при разработке лекарственных форм.

ВЫВОДЫ. Установлено, что исследуемый мономер с высокой вероятностью (Pa=0.805) является субстратом цитохрома P450, что говорит о его активной биотрансформации в организме. Также, обнаружена потенциальная противоопухолевая активность (Pa=0.537), что коррелирует с наличием в структуре фрагмента ($COOCH_3$) и позволяет предположить механизм действия, связанный с ингибированием галектина-3.Соединение характеризуется низкой вероятностью нейротоксических и респираторных побочных эффектов. Умеренный риск локального ульцерогенного действия (Pa=0.558) должен быть принят во внимание при дальнейших исследованиях.

Полученные теоретические данные обосновывают перспективность мономеров пектина в качестве основы для разработки новых фармакологических агентов, в частности, обладающих противоопухолевой активностью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Filimonov D.A., Lagunin A.A., Gloriozova T.A. et al. Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource // *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. — 2014. — Vol. 50, № 3. — P. 444–457.

2. Lagunin A., Stepanchikova A., Filimonov D., Poroikov V. PASS: prediction of activity spectra for biologically active substances // *Bioinformatics*. — 2000. — Vol. 16, № 8. — P. 747–748.

3. Voragen A.G.J., Coenen G.J., Verhoef R.P., Schols H.A. Pectin, a versatile polysaccharide present in plant cell walls // *Structural Chemistry*. — 2009. — Vol. 20. — P. 263–275.

4. Maxwell E.G., Belshaw N.J., Waldron K.W. Pectin — an emerging new bioactive food polysaccharide // *Trends in Food Science & Technology*. — 2012. — Vol. 24, № 2. — P. 64–73.

5. Sriamornsak P. Chemistry of pectin and its pharmaceutical uses: a review // *Silpakorn University International Journal*. — 2003. — Vol. 3, № 1–2. — P. 206–228.

ISSN 3030-3907

6. Munarin F., Tanzi M.C., Petrini P. Advances in biomedical applications of pectin gels // *International Journal of Biological Macromolecules*. — 2012. — Vol. 51, № 4. — P. 681–689.

7. Jackson C.L., Dreaden T.M., Theobald L.K. et al. Pectin induces apoptosis in human prostate cancer cells: correlation of apoptotic function with pectin structure // *Glycobiology*. — 2007. — Vol. 17, № 8. — P. 805–819.

ISSN 3030-3907